

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ENGENHARIA DE ENERGIA

**SIMULAÇÃO DO FLUXO DE CALOR RADIATIVO EM CHAMAS TURBULENTAS DE
GÁS NATURAL UTILIZANDO O CFD (COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS) ANSYS
FLUENT 18.2**

por

Amanda Gonçalves de Figueiredo

Monografia apresentada à Comissão de Graduação do Curso de Engenharia de Energia da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos para obtenção do diploma de Bacharel em Engenharia de Energia.

Porto Alegre, Dezembro de 2019.



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
ENGENHARIA DE ENERGIA

**SIMULAÇÃO DO FLUXO DE CALOR RADIATIVO EM CHAMAS TURBULENTAS DE
GÁS NATURAL UTILIZANDO O CFD (COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS) ANSYS
FLUENT 18.2**

por

Amanda Gonçalves de Figueiredo

ESTA MONOGRAFIA FOI JULGADA ADEQUADA COMO PARTE DOS
REQUISITOS PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE
BACHAREL EM ENGENHARIA DE ENERGIA.
APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELA BANCA EXAMINADORA

Prof. Letícia Jenisch Rodrigues
Coordenadora do Curso de Engenharia de Energia

Orientador: Prof. Dr. Francis Henrique Ramos França

Banca examinadora:

Prof. Dr. Fernando M. Pereira – DEMEC / UFRGS

Prof. Dr. Andrés Armando Mendiburu Zevallos – DEMEC / UFRGS

Prof. Dr. Francis H. R. França – DEMEC / UFRGS

Porto Alegre, 05 de Dezembro de 2019.

FIGUEIREDO, A. G. **Simulação do Fluxo de Calor Radiativo em Chamas Turbulentas de Gás Natural utilizando o CFD (Computational Fluid Dynamics) Ansys Fluent 18.2.** 2019. 28. Monografia (Trabalho de Conclusão do Curso em Engenharia de Energia) – Escola de Engenharia, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2019.

RESUMO

Neste trabalho, é apresentada a simulação computacional de uma chama turbulenta de gás natural com foco na análise do fluxo de calor radiativo. Para a caracterização e análise detalhadas do problema, foi utilizado o CFD (*Computational Fluid Dynamics*) ANSYS Fluent 18.2, software que dispõe de modelos físico-matemáticos adequados para diferentes casos, com solução simultânea de equações de cinética química, mecânica dos fluidos e transferência de calor e massa. A combustão foi resolvida com o modelo *Non-Premixed Combustion - Steady Laminar Diffusion Flamelet* (SLDF), com mecanismo detalhado de reações, e posteriormente com os modelos *Non-Premixed Combustion - Chemical Equilibrium* (CE) e *Species Transport - Eddy Dissipation* (ED), com mecanismos mais simples de reações, a fim de avaliar a sensibilidade do problema à cinética química. Para a radiação, a soma ponderada de gases cinzas (WSGG) foi utilizada como modelo espectral, enquanto o modelo espacial foi resolvido pelo método das ordenadas discretas. A turbulência foi implementada pelo modelo de viscosidade $k-\epsilon$ Padrão, baseado nas equações de *Navier-Stokes* em médias de *Reynolds* (RANS). Devido à complexidade dos fenômenos envolvidos, descritos por equações altamente não lineares, o tempo computacional de convergência também foi considerado na escolha da metodologia e análise dos resultados. Conforme esperado, o modelo SLDF apresentou o resultado de fluxo de calor radiativo mais próximo dos dados experimentais entre os modelos, sendo que o ED foi o que mais se distanciou do experimento, principalmente com a implementação da interação turbulência-radiação (TRI). Isso também foi observado para a concentração de CO_2 e temperatura máxima para esse modelo em comparação com os demais. O modelo CE com quatro passos de reações ficou próximo do SLDF, apresentando-se como uma opção viável para estimativas rápidas de temperatura e fluxo de calor radiativo. Este trabalho insere-se dentro de uma pesquisa mais ampla no Laboratório de Radiação Térmica da UFRGS (LRT), tendo como ponto de partida uma das configurações de simulação utilizadas na pesquisa de doutorado de Lemos, 2019, fazendo-se uso de UDFs de cálculo de radiação desenvolvidas no LRT.

PALAVRAS-CHAVE: gás natural, radiação, turbulência, fluxo de calor radiativo, CFD.

FIGUEIREDO, A. G. **Natural Gas Turbulent Flames Radiative Heat Flux Simulation using CFD (Computational Fluid Dynamics) Ansys Fluent 18.2**. 2019. 27. Monografia (Trabalho de Conclusão do Curso em Engenharia de Energia) – Escola de Engenharia, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2019.

ABSTRACT

In this study, the computational simulation of a turbulent natural gas flame with focus on the analysis of the radiative heat flux is presented. With this objective, the CFD (Computational Fluid Dynamics) Ansys Fluent 18.2 was used for the characterization and detailed analysis of the problem. This software has suitable physical-mathematical models for each case, with simultaneous solution of chemical kinetic equations, fluid mechanics and heat and mass transfer. The combustion was solved with the Non-Premixed Combustion - Steady Laminar Diffusion Flamelet (SLDF) model, with detailed reaction mechanism, and later with the Non-Premixed Combustion - Chemical Equilibrium (CE) and Species Transport - Eddy Dissipation (ED) models, with simpler mechanisms of reactions, in order to evaluate the sensitivity of the problem to chemical kinetics. For the radiation calculation, the weighted gray gas sum (WSGG) was used as the spectral model, while the spatial model was solved with the discrete ordinate method. The turbulence was implemented by the k- ϵ Standard viscosity model, based on the Navier-Stokes equations in Reynolds means (RANS). Due to the complexity of the phenomena involved, described by highly nonlinear equations, the computational convergence time was also considered when choosing the methodology and analyzing the results. As expected, the SLDF model presented the radiative heat flux result closest to the experimental data between the models, and the ED was the one that most distanced from the experiment, especially with the implementation of turbulence-radiation interaction (TRI). This was also observed for the CO₂ mass fraction and maximum temperature for this model compared to the others. The four-step reaction CE model was close to the SLDF, providing a viable option for rapid temperature estimates and radiative heat flux. This study is part of a more extensive research that is being carried out in the Laboratory of Thermal Radiation at UFRGS (LRT), having as a starting point one of the simulation configurations used in the Lemos doctoral research, 2019, making use of UDFs of radiation calculation developed in the LRT.

KEYWORDS: natural gas, radiation, turbulence, radiative heat flux, CFD.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Motivação	1
1.2	Objetivos e Revisão Bibliográfica	1
2	SISTEMA FÍSICO E DOMÍNIO GEOMÉTRICO	2
2.1	Experimento	2
2.2	Domínio Computacional	3
3	FORMULAÇÃO FÍSICO-MATEMÁTICA	5
3.1	Equações de Conservação	5
3.1.1	Conservação de Massa – Continuidade	5
3.1.2	Conservação da Quantidade de Movimento - Momentum	6
3.1.3	Conservação das Espécies Químicas	6
3.1.4	Conservação da Energia	6
3.2	Modelagem da Turbulência	7
3.2.1	Equações de Navier-Stokes em Médias de Reynolds - RANS	7
3.3	Resolução numérica das equações de conservação	8
3.4	Modelagem da Combustão	8
3.4.1	<i>Non-premixed combustion</i>	8
3.4.2	<i>Species Transport e Eddy Dissipation</i>	9
4	RADIAÇÃO TÉRMICA	10
4.1	Corpo negro	11
4.2	Intensidade de radiação térmica	11
4.3	Intensidade de radiação em meio participantes	12
4.3.1	Equação de Transferência Radiativa	12
4.4	Modelagem da Radiação Térmica	12
4.4.1	Modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG)	13
4.5	Interação Turbulência-Radiação (TRI)	15
5	SIMULAÇÃO	16
6	RESULTADOS E DISCUSSÃO	16
7	CONCLUSÕES	21
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	22

1 INTRODUÇÃO

1.1 Motivação

O gás natural (GN) destaca-se pela disponibilidade presente no suprimento desta fonte, em contrapartida com a intermitência das fontes renováveis e as dificuldades de armazenamento adequado dessa energia. Em eminência de crescimento pela exploração do pré-sal, abertura ao mercado estrangeiro e planos de expansão da malha dutoviária, destaca-se como combustível de potencial oferta no Brasil, com estabilidade operacional e alta capacidade de rendimento energético.

O GN combustível destina-se a diversos mercados de consumo, atendendo aos segmentos industrial, comercial, veicular, residencial e de cogeração de energia. Também costuma ser queimado em *flares* como solução para seu descarte quando em excesso na extração do petróleo. *Flares* consistem em tubulações projetadas para o transporte e queima de grandes quantidades de gases inflamáveis em segurança, que são conduzidos até a ponta onde ocorre combustão e formação de uma chama de alta intensidade. O estudo das chamas de gás natural torna-se, então, de suma importância, e os motivos são diversos, como, por exemplo, melhorias de eficiência energética, minimização de impactos ambientais e garantia da segurança dos processos.

A composição do gás natural pode variar bastante, sendo o gás metano o principal componente. A combustão do metano, quando é completa, libera como produtos o dióxido de carbono e vapor de água, sendo os dois componentes não tóxicos. Neste sentido, o gás natural também é vantajoso quando em comparação a outros combustíveis fósseis mais poluentes, como gás liquefeito de petróleo (GLP), óleos combustíveis, lenha e carvão. Neste trabalho, a chama escolhida é composta de metano (CH_4), dióxido de carbono (CO_2), nitrogênio (N_2), etano (C_2H_6), e propano (C_3H_8) em fronteira livre.

Em aplicações industriais e em condições naturais, escoamentos turbulentos são mais comuns e, combinada às reações químicas, a turbulência beneficia a mistura dos reagentes e o transporte de calor. As chamas turbulentas difusivas ou não pré-misturadas, foco deste trabalho, são mais utilizadas devido ao maior controle do processo de combustão quando comparado com chamas pré-misturadas.

Em processos de combustão, a radiação térmica é o modo de transferência de calor predominante devido à presença de gases participantes em altas temperaturas. Considerações adequadas desse fenômeno são necessárias para obtenção de resultados satisfatórios para o fluxo de calor radiativo (em W/m^2), temperatura da chama e seus demais parâmetros. Entretanto, a radiação térmica em uma chama turbulenta possui dependência espectral, relacionada ao espectro eletromagnético; dependência espacial, relacionada à não-homogeneidade dos campos de temperatura e concentrações de espécies; e direcional, relacionada à propagação da radiação no ângulo sólido; portanto, sua modelagem computacional se torna fundamental para redução do tempo de solução.

1.2 Objetivos e Revisão Bibliográfica

O problema considerado consiste de uma chama turbulenta de gás natural onde o objetivo principal é analisar o fluxo de calor radiativo emitido, comparando-se resultados numérico-computacionais com medições experimentais. Ao considerar a complexidade dos fenômenos envolvidos em uma chama turbulenta, resolver com exatidão o escoamento, a turbulência, a cinética química e a radiação térmica não é uma tarefa possível. Desta forma, pretendeu-se estabelecer as metodologias que conduzam a resultados satisfatórios na comparação com os dados experimentais, porém que possibilitem maior facilidade de convergência e redução de tempo computacional.

A combustão e a cinética química foram resolvidas com o modelo *Steady Laminar Diffusion Flamelet* (SLDF), formalizado por Peters (1984), que considera a chama como um grupo de estruturas de chamas laminares quase unidimensionais, e que forneceu resultados precisos em comparação com dados experimentais (ENAMI e FARD, 2012). Posteriormente, alternou-se para os modelos *Chemical Equilibrium* e *Species Transport*, a fim de avaliar a sensibilidade do problema à cinética química. Para a turbulência, o modelo escolhido foi o k- ϵ Padrão, baseado nas equações de Navier-Stokes em médias de Reynolds (RANS - *Reynolds-Average Navier-Stokes*), o qual mostrou resultados precisos no trabalho de Deon (2016).

O modelo espectral para a radiação térmica foi o da soma-ponderada-de-gases cinza (WSGG- *Weighted-Sum-of-Gray-Gases*) enquanto o modelo espacial utilizado foi ordenadas discretas (DOM - *Discrete Ordinates Method*). O modelo WSGG considera que todo o espectro pode ser dividido em certo número de gases cinzentos com coeficiente de absorção constantes, o que apresentou resultados precisos em trabalhos recentes (Fonseca, 2017 e Centeno, 2016). A interação da turbulência com a radiação (TRI) foi aproximada utilizando-se a proposta de Snegirev (2004), a qual considera uma correlação combinada entre o coeficiente de absorção e a temperatura e uma auto-correlação da temperatura.

A comparação das simulações computacionais foi realizada com dados de medições experimentais de chamas turbulentas realizadas no Laboratório de Combustão (LC) da UFRGS.

2 SISTEMA FÍSICO E DOMÍNIO GEOMÉTRICO

A chama é difusiva, ou seja, os reagentes estão inicialmente separados e se combinam através da difusão. A chama é circundada pelo ar em fronteira livre, com movimento induzido pela chama e à temperatura ambiente. Desta forma, caracteriza-se um problema de convecção livre. A Figura 1 apresenta a chama experimental estudada. A imagem é parte de uma sequência contínua de imagens instantâneas da chama, fotografada no LC/UFRGS.

Figura 1 - Chama turbulenta de gás natural em fronteira livre.



Fonte: Laboratório de Combustão/UFRGS, 2018.

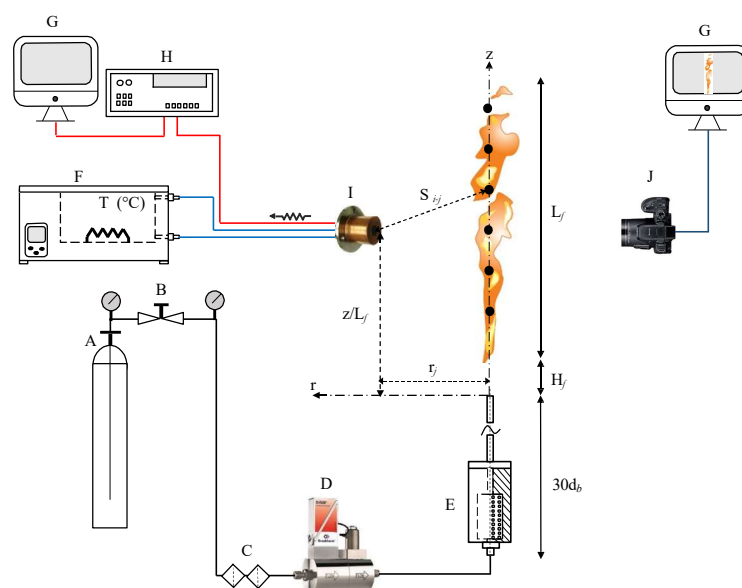
2.1 Experimento

O combustível utilizado foi gás natural proveniente da Bolívia (A), com a composição, em fração molar, de $\text{CH}_4 = 0,908$, $\text{C}_2\text{H}_6 = 0,060$, $\text{C}_3\text{H}_8 = 0,012$, $\text{CO}_2 = 0,005$, $\text{N}_2 = 0,015$ e diluição de 40 % de CO_2 para redução da fuligem, a qual não foi modelada. A composição do oxidante é de $\text{O}_2 = 0,208$, $\text{N}_2 = 0,784$ e $\text{H}_2\text{O} = 0,008$.

A Figura 2 apresenta o esquema da bancada experimental. O experimento foi realizado injetando-se o combustível a uma velocidade de $V = 3,1 \text{ m/s}$ em um queimador com formato cilíndrico de aço inox

(E), que contém em sua parte inferior um compartimento interno de esferas de vidro e telas de aço para ajudar a homogeneizar a mistura dos gases. O queimador possui diâmetro interno d igual a 16,55 mm, e comprimento igual a $30d$. A vazão de combustível injetada foi mensurada por um controlador eletrônico Omêga (FMA-2600A) (D) com incerteza de $\pm 0,8 \%$ de leitura e $\pm 0,2 \%$ de escala de medição. Foram empregados três transdutores de fluxo de calor radiante: MEDTHERM 64-0.5-20/ZnSeW-1C, MEDTHERM 64-5-20/ZnSeW-1C e VATELL TG9000-9, (I). Cada transdutor ou sensor emite um sinal de saída elétrico que é proporcional ao fluxo de calor radiante absorvido pelo sensor. Os sensores possuem uma incerteza de 3 % do sinal mais 2 % da escala de medição. O sinal foi coletado por um *datalogger* Agilent 34972A, (H), com uma incerteza de 0,005 % da leitura mais 0,004 % da escala de medição. Os sensores foram arrefecidos para manter a temperatura de referência constante durante a medição nas condições experimentais (F).

Figura 2 - Bancada experimental.



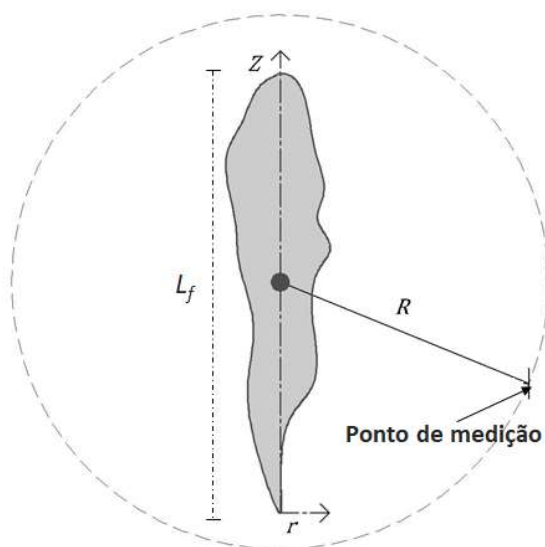
Fonte: Laboratório de Combustão/UFRGS, 2018.

A medição de fluxo de calor radiante considerou o valor nominal produzido pela chama menos o valor da radiação emitida para as vizinhanças, obtendo-se assim o fluxo líquido. Para realizar as medições do fluxo de calor radiante, sensores foram posicionados em referência normalizada ao comprimento de chama L_f . Três posições radiais foram definidas: $R1 = 0,5L_f$, $R2 = 1,0L_f$ e $R3 = 2,0L_f$. A Figura 3 ilustra o procedimento de medição do fluxo líquido de calor radiante para uma distância radial da chama. Em cada distância radial foram obtidas 24 medições distribuídas ao longo de uma linha paralela ao eixo principal da chama. As medições foram realizadas em um ambiente quiescente para evitar perturbações externas.

2.2 Domínio Computacional

O domínio geométrico da simulação computacional consiste, longitudinalmente, de $30 \times d$, correspondentes ao comprimento do queimador (0,4965 m), mais $2,5 \times L_f$, portanto superior ao comprimento da chama, e $0,5 \times L_f$ radialmente. Este último corresponde à posição radial definida para a geração dos valores de fluxo radiativo no *software* computacional e posterior comparação com os dados experimentais. O domínio foi montado de forma a representar metade do sistema real, para que, após cálculo dos resultados em um lado, o *software* os revolucionasse em torno de um eixo axissimétrico coaxial ao eixo do queimador. Isso foi possível devido ao uso da abordagem RANS, detalhada posteriormente na Seção 3.3 - Modelagem da Turbulência.

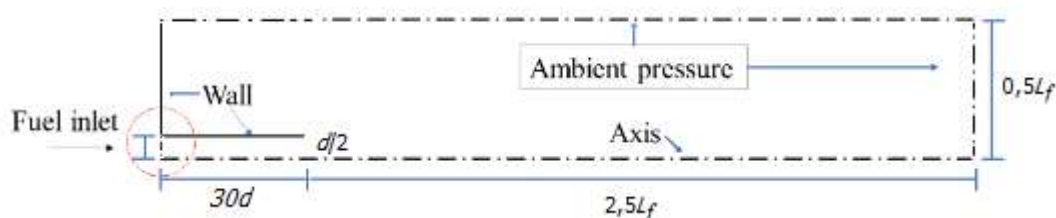
Figura 3 - Ilustração do ponto de medição experimental do fluxo de calor radiante a uma distância radial R proporcional ao comprimento de chama L_f .



Fonte: MIGUEL e SCHAEFER, 2016 – adaptado pela AUTORA.

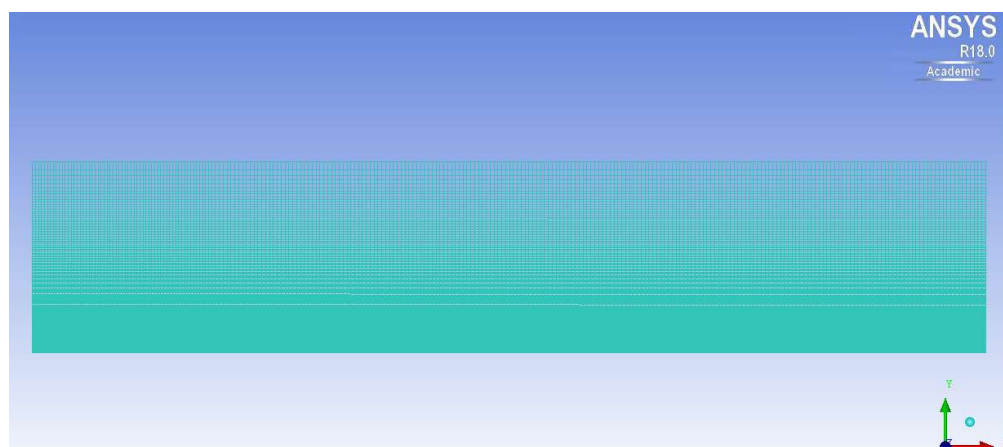
A principal razão para esta simplificação é a significativa redução do tempo computacional requerido na simulação. A Figura 4 apresenta este domínio especificando as condições de contorno e a Figura 5 apresenta a malha correspondente, a qual foi gerada no software ICEM CFD e efetivamente carregada ao Ansys Fluent para solução do problema. As condições de contorno incluem a entrada de combustível, a parede do queimador e a pressão ambiente.

Figura 4 - Domínio geométrico e condições de contorno.



Fonte: Sandia National Laboratories, 2017 – adaptado pela Autora.

Figura 5 - Malha gerada no ICEM CFD.



Fonte: Lemos, 2018 – adaptado pela Autora.

Malhas representam parte de um plano pela combinação de formas geométricas como triângulos, quadriláteros, tetraedros e poliedros, de forma que problemas podem ser resolvidos computacionalmente pelo método dos volumes finitos – MVF, com resolução de equações de balanço de massa, energia e quantidade de movimento a cada volume discretizado. A malha deste estudo consiste em uma combinação de formas retangulares com maior refinamento (maior número de elementos) no plano correspondente às regiões de altos gradientes, ou seja, na região onde a chama se desenvolve. A distribuição adequada de volumes entre regiões de baixos e altos gradientes (razão entre volumes) e a razão de aspecto (alongamento) também foram consideradas.

3 FORMULAÇÃO FÍSICO-MATEMÁTICA

3.1 Equações de Conservação

O ANSYS Fluent resolve equações de conservação da massa e do momentum para todos os tipos de escoamento, com acréscimo de resolução da conservação da energia e das espécies químicas para os escoamentos que envolvem transferência de calor, mistura de espécies e reações químicas, como é o caso da combustão.

Supondo coordenadas cilíndricas e um escoamento de velocidade $\vec{u} = u\vec{z} + v\vec{r} + w\vec{k}$ que transporta uma variável genérica φ , as equações de conservação podem ser descritas genericamente como:

$$\underbrace{\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t}}_{\text{Acúmulo temporal}} + \underbrace{\nabla(\rho\vec{u}\varphi)}_{\text{Advecção de } \varphi} = \underbrace{\nabla(\vec{J}_\varphi\nabla\varphi)}_{\text{Difusão de } \varphi} + \underbrace{S_\varphi}_{\text{Taxa de geração de } \varphi} \quad (3.1)$$

onde:

ρ = massa específica;
 ∇ = gradiente diferencial;
 \vec{J}_φ = vetor de difusão de φ ;
 S_φ = termo fonte de φ .

Em regime permanente, turbulento e com representação em geometria 2D axissimétrica, têm-se as equações de conservação fundamentais apresentadas nas subseções seguintes.

3.1.1 Conservação de Massa – Continuidade

A equação da conservação da massa é dada pela equação 3.2:

$$\frac{\partial}{\partial z}(\bar{\rho}\bar{u}) + \frac{\partial}{\partial r}(\bar{\rho}\bar{v}) + \frac{(\bar{\rho}\bar{v})}{r} = 0 \quad (3.2)$$

onde $\bar{\rho}$ é a massa específica temporal média da mistura, computada por médias de Favre (seção 3.3), e \bar{u} e \bar{v} são as componentes da velocidade temporal média nas direções axial e radial z e r respectivamente. Para a velocidade de injeção em estudo, as variações na massa específica da mistura dependem mais de variações da temperatura do que da pressão, de forma que

$$\rho = \frac{p^0 MW}{R_u T} \quad (3.3)$$

na qual p^0 é a pressão de referência (atmosférica), MW a massa molecular da mistura, R_u a constante universal dos gases ideais e T a temperatura.

3.1.2 Conservação da Quantidade de Movimento - Momentum

As equações de conservação da quantidade de movimento nas direções axial e radial são dadas respectivamente por:

$$\begin{aligned} \bar{u} \frac{\partial}{\partial z}(\bar{\rho} \bar{u}) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r}(\bar{\rho} \bar{u}) = & -\frac{\partial p^*}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left((\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r(\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_t \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (3.4)$$

$$\begin{aligned} \bar{u} \frac{\partial}{\partial z}(\bar{\rho} \bar{v}) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r}(\bar{\rho} \bar{v}) = & -\frac{\partial p^*}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial z} \left((\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r(\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_t \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right) - \frac{(\mu + \mu_t) \bar{v}}{r^2} + \frac{(\bar{\rho} \bar{w}^2)}{r} \end{aligned} \quad (3.5)$$

onde μ é a viscosidade dinâmica do fluido e μ_t é a viscosidade turbulenta do escoamento, dependente do modelo de turbulência empregado. O termo p^* é a pressão modificada devido a difusão turbulenta, representando uma parcela das Tensões de Reynolds dependente da energia cinética turbulenta k .

3.1.3 Conservação das Espécies Químicas

A equação da conservação da massa das espécies químicas é descrita por:

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial z}(\bar{\rho} \bar{y}_\alpha) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r}(\bar{\rho} \bar{y}_\alpha) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\left(\frac{\mu}{S_c} + \frac{\mu_t}{S_{c_t}} \right) \frac{\partial \bar{y}_\alpha}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\left(\frac{\mu}{S_c} + \frac{\mu_t}{S_{c_t}} \right) \frac{\partial \bar{y}_\alpha}{\partial r} \right) + \dot{\omega}_\alpha \quad (3.6)$$

onde \bar{y}_α é a fração mássica temporal média da espécie α e $\dot{\omega}_\alpha$ representa a sua taxa volumétrica de produção/destruição. O número de Schmidt S_c é a razão entre as difusividades de momento e de massa, sendo o número de Schmidt turbulento representado por S_{c_t} .

3.1.4 Conservação da Energia

A equação da energia, em termos da entalpia total da mistura, considerando o escoamento reativo em regime turbulento é dada por:

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial z}(\bar{\rho} h) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r}(\bar{\rho} h) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\left(\frac{k}{c_p} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial h}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left(\frac{k}{c_p} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial h}{\partial r} \right) + \dot{S}^h \quad (3.7)$$

A entalpia total da mistura h é definida pelo somatório das entalpias médias temporais de cada espécie:

$$h = \sum_{\alpha} y_{\alpha} h_{\alpha} \quad (3.8)$$

sendo que a entalpia de cada espécie α dada por:

$$h_{\alpha} = h_{\alpha}^0 + \int_{T_{ref}}^{\bar{T}} c_{p,\alpha} dT \quad (3.9)$$

h_α^0 é a entalpia de formação da espécie α , T_{ref} é a temperatura de referência e $c_{p,\alpha}$ é o calor específico a pressão constante da espécie α , dado por:

$$c_p = \sum_{\alpha} y_{\alpha} c_{p,\alpha} \quad (3.10)$$

O termo fonte da equação da conservação da energia, \dot{S}^h , é constituído pelo negativo do divergente do fluxo de calor radiativo S_{rad} :

$$S_{rad} = -\nabla \cdot \vec{q}_r \quad (3.11)$$

e por uma parcela proveniente da cinética química, dada por S_{rea} :

$$S_{rea} = -\sum_{\alpha} \frac{h_{\alpha}^0}{MW} \dot{\omega}_{\alpha} \quad (3.12)$$

3.2 Modelagem da Turbulência

As três principais metodologias para modelar a *viscosidade turbulenta* são: *Direct Numerical Simulation* – (DNS), *Large-Eddy Simulation* (LES) e *Reynolds-Average Navier-Stokes equations* (RANS). Pela relativa facilidade de implementação e convergência, a abordagem RANS foi a utilizada neste trabalho.

3.2.1 Equações de Navier-Stokes em Médias de Reynolds - RANS

Pela abordagem RANS, as propriedades instantâneas do fluido são separadas em uma parte média mais uma flutuação no tempo, com a aplicação de média temporal nas equações governantes apresentadas. Isso leva a termos adicionais nas equações de transporte, como as já citadas Tensões de Reynolds, que, basicamente, carregam os efeitos da turbulência no fluido, e a viscosidade turbulenta, sendo esta uma propriedade do escoamento, que indica o nível de turbulência local.

A viscosidade turbulenta do modelo é função de dois parâmetros presentes em duas equações apresentadas por Kolmogorov em 1942, uma para resolver a equação de transporte para a energia cinética turbulenta k e a outra uma equação de transporte adicional para a taxa de dissipação de energia por unidade de volume e de tempo ε .

3.2.1.1 Modelo k - ε

As equações de conservação para energia cinética turbulenta k , e a dissipação ε , em regime permanente e em coordenadas cilíndricas axissimétricas são dadas por:

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} k) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\bar{\rho} k) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial r} \right) + P_k - \bar{\rho} \varepsilon \quad (3.13)$$

$$\begin{aligned} \bar{u} \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} \varepsilon) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\bar{\rho} \varepsilon) = & \frac{\partial}{\partial z} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\varepsilon}} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\varepsilon}} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} \right) \\ & + C_{1,\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{2,\varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{k} \end{aligned} \quad (3.14)$$

P_k é o termo de produção/dissipação de energia cinética turbulenta e pode ser definido como:

$$P_k = \mu_t \left(2 \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial r} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right)^2 + 2 \left(\frac{\bar{v}}{r} \right)^2 \right) \quad (3.15)$$

e a viscosidade turbulenta é calculada da forma:

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.16)$$

os valores das constantes do modelo são $C_{1\varepsilon} = 1,60$; $C_{2\varepsilon} = 1,92$; $C_\mu = 0,09$; $\sigma_k = 1,0$ e $\sigma_\varepsilon = 1,3$, obtidas empiricamente e modificadas do modelo k-e Padrão (Morse, 1977 e Pope, 1978).

3.3 Resolução numérica das equações de conservação

Os termos adicionais nas equações, resultantes da decomposição das variáveis em uma parte média temporal e uma parte instantânea dependente do tempo acabam por atuar como um termo fonte de massa para o campo médio do escoamento ($\overline{\rho' \gamma(t)'}^t$). Estes termos são de difícil manipulação em códigos CFD, e, para solucionar isso, estes resolvem médias de Favre. A decomposição de Favre exprime o valor instantâneo de um escalar em um valor médio e uma flutuação, na qual esse valor médio é definido através da ponderação do valor instantâneo pela massa específica do fluido (Deon, 2016). Porém, a sua utilização não compromete o conceito geral do método RANS, e apenas conduz a equações mais simples para os campos médios das variáveis dependentes, se adaptando melhor às técnicas estatísticas desenvolvidas para a combustão turbulenta.

3.4 Modelagem da Combustão

Dentre os modelos de combustão disponíveis no Ansys Fluent, foram utilizados o *Non-Premixed Combustion*, com as modelagens *Steady Laminar Diffusion Flamelet (SLDF)* e *Chemical Equilibrium*, e o *Species Transport*, com a abordagem *Eddy Dissipation* para a turbulência.

3.4.1 Non-premixed combustion

Modelo disponível apenas para escoamentos turbulentos. Essa modelagem permite que a termoquímica seja reduzida a um único parâmetro: a fração de mistura, que se baseia na conservação dos elementos atômicos em reações químicas.

3.4.1.1 Fração de mistura

A fração de mistura f define o estado termoquímico do fluido por uma quantidade escalar que é conservada, assumindo inicialmente o valor 0 no escoamento do oxidante, 1 no escoamento do combustível e valores entre 0 e 1 no decorrer do escoamento. Pode ser descrita em termos da fração mássica atômica:

$$f = \frac{Z_i - Z_{i,ox}}{Z_{i,fuel} - Z_{i,ox}} \quad (3.17)$$

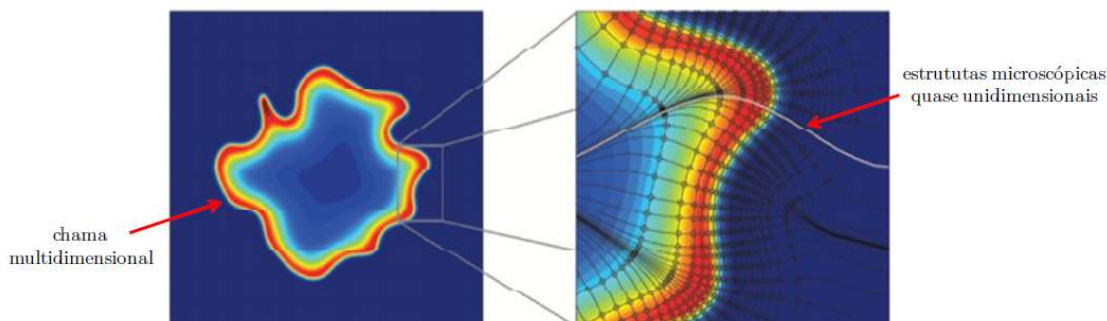
onde Z_i são as massas atômicas dos elementos i presentes nas vazões de combustível e oxidante. A combustão assim é simplificada como um problema de mistura, evitando dificuldades no fechamento de taxas médias não lineares de reações da cinética química. As equações de conservação das espécies podem ser reduzidas a uma única equação para a fração da mistura, sob o pressuposto de difusividades iguais, aceitável para fluxos turbulentos onde convecção turbulenta supera a difusão molecular.

3.4.1.2 Steady Laminar Diffusion Flamelet (SLDF)

O modelo *Steady Laminar Diffusion Flamelet (SLDF)* é a opção de mistura próxima ao equilíbrio químico, e representa a chama por um conjunto de elementos laminares de chama quase unidimensionais (Figura 6), denominados *flamelets*. O conceito de *flamelet* fundamenta-se na teoria de Kolmogorov, 1941, na qual as menores escalas de turbulência são similares para qualquer fluxo turbulento e, fisicamente, são as estruturas que mantém as suas características fundamentais, apesar de transportadas e deformadas pelas

condições locais do escoamento. Isto permite desacoplar a convecção da reatividade do escoamento, ainda que turbulento.

Figura 6 - Estruturas microscópicas em uma chama multidimensional.



Fonte: Deon, 2016.

Em conjunto com alguma outra variável que consiga contabilizar o afastamento da condição de equilíbrio, como temperatura, massa específica da mistura e frações mássicas das espécies químicas, a fração de mistura para esta abordagem deve ser capaz de descrever a estrutura local da chama, sendo para isso necessários códigos de mecanismos de cinética química detalhados, como GRI-Mech, utilizados neste trabalho. As variáveis são resolvidas, tabeladas e armazenadas em um banco de dados, sendo recuperadas durante a simulação.

3.4.1.3 Chemical Equilibrium

Uma vez misturada, a química também pode ser modelada como estando em equilíbrio químico - situação em que a proporção entre os reagentes e produtos da reação química se mantém constante ao longo do tempo - e as concentrações de espécies de interesse determinadas a partir da fração de mistura usando essa suposição. Com este modelo, também pode-se incluir passos intermediários de reações e dissociação, produzindo previsões mais realistas das temperaturas da chama do que o modelo *Eddy-Dissipation*.

3.4.1.4 Probability Density Function (PDF)

Os efeitos da turbulência são incorporados aos resultados obtidos para temperatura, massa específica da mistura e frações mássicas das espécies provenientes da solução dos *flamelets* laminares ou do equilíbrio químico através do método da Função Densidade de Probabilidade, que fornece uma descrição estatística das flutuações dos escalares do escoamento. A que faz parte do código CFD empregado é a função de distribuição beta, que pode ser encontrada em maiores detalhes em Lemos, 2018.

3.4.2 Species Transport e Eddy Dissipation

Alternando-se o modelo de espécies para *Species Transport*, o ANSYS Fluent resolve as equações de conservação para cada espécie química. A fração mássica local de cada espécie, Y_α , é estimada através da solução das equações para $N-1$ espécies, onde N é o número total de espécies químicas de fase gasosa presentes no sistema. Como a soma das frações mássicas das espécies deve totalizar a unidade, a fração mássica N_{th} é determinada como 1 menos a soma das $N-1$ frações mássicas resolvidas. Para minimizar o erro numérico, as N_{th} espécies selecionadas devem ser aquelas com maior fração mássica geral, como é o caso do N_2 quando o ar é o oxidante.

3.4.2.1 Difusão mássica

Por padrão, o ANSYS usa a lei de *Fick* para modelar a difusão mássica devido aos gradientes de concentração. Para escoamentos turbulentos, pode ser escrita como

$$\vec{J}_\alpha = -\left(\rho D_{\alpha,m} + \frac{\mu_t}{Sc_t}\right) \nabla Y_\alpha - D_{\alpha,T} \frac{\nabla T}{T} \quad (3.18)$$

onde \vec{J}_α é o fluxo de difusão da espécie α , que surge devido a gradientes de concentração e temperatura, $D_{\alpha,m}$ é o coeficiente de difusão mássica para espécie α na mistura e $D_{\alpha,T}$ é o coeficiente de difusão térmico. O Sc_t padrão é 0,7.

3.4.2.2 Interação turbulência e cinética química (TCI)

O *Eddy-dissipation model* foi baseado no trabalho de Magnussen e Hjertager, 1976, e é a opção do *Species Transport* que assume as taxas de reação como controladas pela turbulência, pois, nesta condição, o combustível reage rapidamente, o que permite negligenciar um mecanismo detalhado das reações químicas e assumir uma reação instantânea após a mistura. A taxa de produção das espécies α devido a reação r , $\dot{\omega}_{\alpha,r}$, é dada pela menor das duas expressões:

$$\dot{\omega}_{\alpha,r} = v'_{\alpha,r} M_{w,\alpha} A \rho \frac{\varepsilon}{k} \min \left(\frac{Y_R}{v'_{R,r} M_{w,R}} \right) \quad (3.19)$$

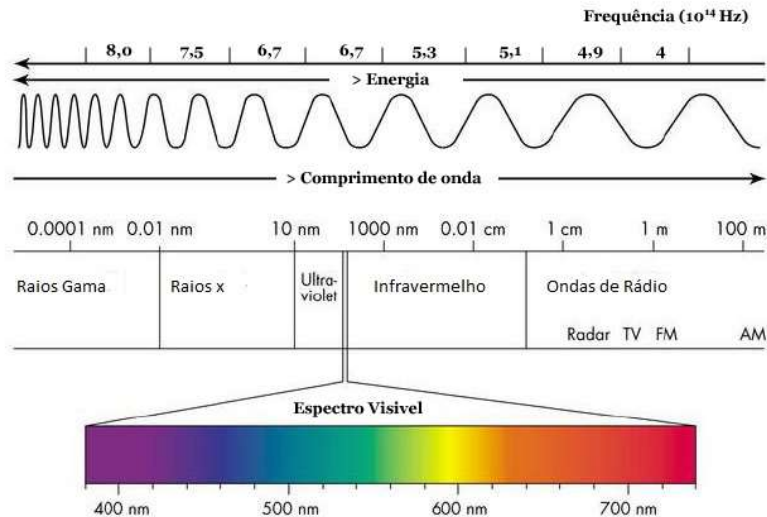
$$\dot{\omega}_{\alpha,r} = v'_{\alpha,r} M_w A B \rho \frac{\varepsilon}{k} \frac{\sum Y_P}{\sum_{\alpha} v'_{\alpha,r} M_{w,\alpha}} \quad (3.20)$$

onde $v'_{\alpha,r}$ são os coeficientes estequiométricos, Y_P é a fração mássica dos produtos, Y_R dos reagentes e A e B são constantes empíricas iguais a 4 e 0,5, respectivamente. Neste modelo a reação química é governada por $\frac{k}{\varepsilon}$, que representa a mistura em uma escala de tempo, sendo que a combustão inicia sempre que a turbulência esteja presente no escoamento ($\frac{k}{\varepsilon} > 0$). Isso evita cálculos computacionalmente pesados de *Arrhenius* (opção *finite rate*) para a cinética química, e como esses cálculos determinam os parâmetros dos mecanismos de reação, para resultados corretos apenas uma ou duas reações intermediárias devem ser usados. Para incluir mecanismos detalhados de cinética química o Fluent oferece o *Eddy-dissipation-concept* (EDC) model, porém este modelo é mais apropriado para a abordagem *Large-Eddy Simulation* (LES) da turbulência, pois este modela as escalas menores da cinética química.

4 RADIAÇÃO TÉRMICA

A radiação térmica emitida é diretamente proporcional à temperatura da superfície elevada na quarta potência, evidenciando assim a sua importância em processos a elevadas temperaturas. É o mecanismo de transferência de calor que não precisa de um meio para se propagar, emitida por todo corpo em alguma faixa do espectro eletromagnético. A Figura 7 apresenta o espectro eletromagnético de radiação conhecido.

Figura 7 - Espectro da radiação eletromagnética.



Fonte: Lemos, 2018.

Para descrever uma onda eletromagnética, basta conhecer seu comprimento de onda λ ou a frequência ν , pois a velocidade da onda é constante, dada pela velocidade da luz $c = 2,998 \times 10^8 \text{ m/s}$. A Eq. (4.1) estabelece a relação inversamente proporcional entre o comprimento de onda e a frequência.

$$\lambda = \frac{c}{\nu} \quad (4.1)$$

A energia da radiação eletromagnética é diretamente proporcional à frequência, sendo transportada por fótons, pacotes de energia definidos com a introdução da física quântica. A radiação térmica encontra-se no intervalo de comprimento de onda que vai de 0,1 a 1000 nm, sendo assim, inclui uma parcela da radiação ultravioleta, o espectro visível (compreendido no intervalo de comprimento de onda entre 400nm e 700nm) e o infravermelho. A intensidade da radiação emitida varia com o comprimento de onda e, além disso, a radiação térmica possui uma característica direcional, pois uma superfície pode emitir preferencialmente em certas direções.

4.1 Corpo negro

O corpo negro é uma idealização teórica de um corpo físico que absorve toda a energia radiante incidente, independente da direção e do comprimento de onda. Essa idealização é importante pois estabelece um padrão para comparação de absorção e emissão de corpos reais. A lei de Stefan-Boltzmann define o poder emissivo total do corpo negro:

$$e_b = \sigma T^4 \quad (4.2)$$

na qual $\sigma = 5,6704 \times 10^{-8} \text{ W/(m}^2\text{K}^4)$ é a constante de Stefan-Boltzmann. A intensidade de radiação total associada à emissão do corpo negro, cuja unidade é W/m^2 , independe da direção e é dada por:

$$I_b = \frac{\sigma T^4}{\pi} \quad (4.3)$$

A fração da energia incidente que é absorvida, emitida, transmitida e refletida são respectivamente determinadas pelas propriedades de superfície absorvidade α , emissividade ε , transmissividade τ e a refletividade ρ . A emissividade pode ser definida como a razão entre a radiação emitida pela superfície e a radiação emitida pelo corpo negro à mesma temperatura, conforme Eq. (4.4). Assim, a emissividade hemisférica total representa a média sobre todas as direções e comprimentos possíveis.

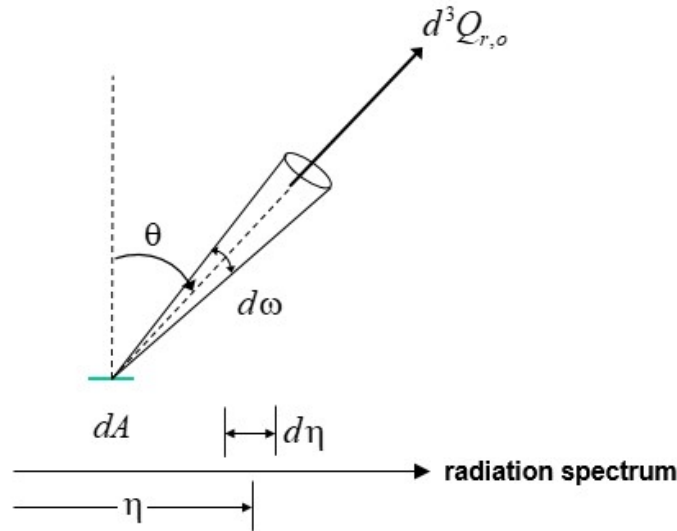
$$\varepsilon(T) = \frac{e(T)}{e_b(T)} \quad (4.4)$$

4.2 Intensidade de radiação térmica

A Figura 8 traz um elemento de área dA em um meio participante com emissão de radiação em uma direção especificada pelo ângulo θ a partir de um sistema de coordenadas esféricas. A área dA compreende um ângulo sólido $d\omega$. A intensidade de radiação espectral I_η é dada por:

$$I_\eta = \frac{d^3 Q_{r,o}}{\cos\theta dA d\omega d} \quad (4.5)$$

e possui unidade de $\text{W/(m}^2 \cdot \mu\text{m sr)}$. Integrando-se essa equação em todas as direções e em todo o espectro de comprimentos de onda η , tem-se o poder emissivo total E em W/m^2 .

Figura 8 - Emissão da radiação por uma área diferencial dA .

Fonte: França, 2017.

4.3 Intensidade de radiação em meio participantes

Um meio participante absorve, emite e espalha radiação térmica. Para determinar a taxa de transferência de calor em um meio participante deve-se resolver a equação de transferência radiativa (*Radiative Transfer Equation* - RTE) 4.6 no espaço e no espectro. Assim, pode-se determinar o aumento de intensidade devido à emissão e devido ao espalhamento na direção do caminho da intensidade e os efeitos de atenuação da intensidade devido à absorção e ao espalhamento em outras direções.

A variação da intensidade de radiação no meio em decorrência do espalhamento é desprezada neste trabalho, pois não há significativa formação de particulados, como haveria na queima de combustíveis sólidos, por exemplo.

4.3.1 Equação de Transferência Radiativa

A equação da transferência radiativa que define a intensidade de energia radiativa, dI_η , em um meio que emite e absorve energia ao longo de um caminho, $d\xi$, é dada por:

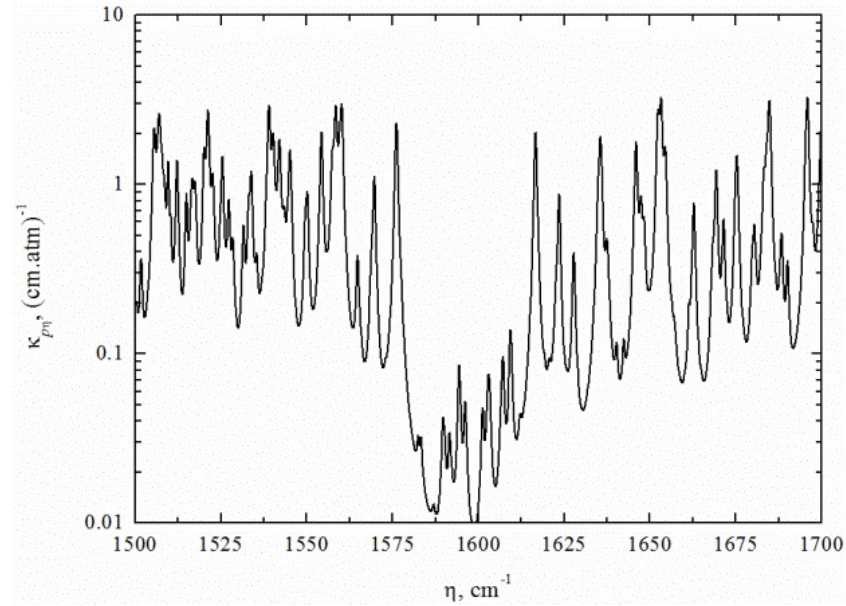
$$\frac{dI_\eta(\xi)}{d\xi} = -\kappa_\eta(\xi)I_\eta(\xi) + \kappa_\eta(\xi)I_{\eta b}(\xi) \quad (4.6)$$

onde $I_\eta(\xi)$ e $I_{\eta b}(\xi)$ são a intensidade espectral e a intensidade espectral de corpo negro na posição ξ ao longo do caminho e κ_η é o coeficiente de absorção espectral do meio, foco da modelagem da radiação apresentada na seção seguinte.

4.4 Modelagem da Radiação Térmica

Transições de nível de energia ocorrem quando há emissão e/ou absorção de radiação térmica e estão associadas a determinadas frequências (ou números de onda). Para cada frequência específica, são posicionadas linhas espectrais de espessura infinitesimal e com efeitos de alargamento, decorrentes, principalmente, do aumento das colisões nos gases a altas temperaturas, perturbando os estados de energia dos átomos e moléculas. As propriedades radiativas dos gases possuem forte dependência espectral, conforme a Fig. 9.

Figura 9 - Representação em alta-resolução do coeficiente de absorção para H₂O a 400 K e 1.0 atm em uma faixa espectral de $1500 \text{ cm}^{-1} < \eta < 1700 \text{ cm}^{-1}$ (0.67% da faixa espectral total, $0 < \eta < 30,000 \text{ cm}^{-1}$).

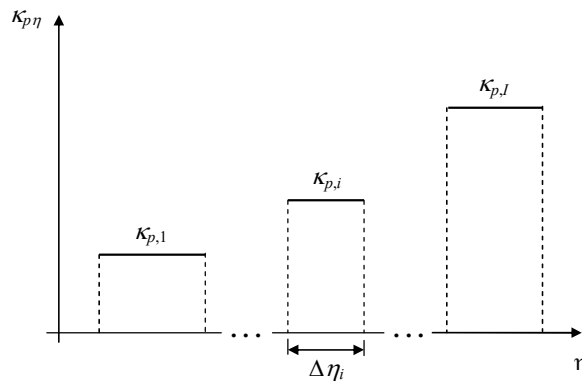


Fonte: Dorigon *et. al*, 2013.

4.4.1 Modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG)

Para resolver o problema da alta variação espectral do coeficiente de absorção - necessário para solução da equação da transferência radiativa (RTE) - Hottel e Sarofim propuseram, em 1967, a representação da variação espectral do coeficiente de absorção por um pequeno número de gases cinzas. Esse método embasa o modelo de soma ponderada de gases cinzas (WSGG), no qual cada gás cinza tem um coeficiente de absorção que pode ser considerado constante, conforme Figura 10.

Figura 10 - Representação do coeficiente de absorção com WSGG usando I gases cinzas.



Fonte: Dorigon *et. al*, 2013.

Nota-se a simplicidade do modelo comparando-se a Fig. 10 com o espectro de H₂O mostrado na Fig. 9. O modelo assume que o i -ésimo gás cinza cobre uma porção fixa $\Delta\eta_i$ no espectro, embora não necessariamente contínua. Outra suposição fundamental do modelo WSGG é que cada coeficiente de absorção $\kappa_{p,i}$ é assumido como independente da temperatura T e da pressão parcial p_a das espécies

participantes. Desta forma, essas duas considerações desacoplam a dependência do coeficiente de absorção com o número de onda e com o estado termodinâmico (temperatura e concentração das espécies participantes).

4.4.1.1 Aplicação do Modelo WSGG na Solução do Fluxo de Calor Radiativo

Este estudo considera uma mistura de vapor d'água e dióxido de carbono como espécies participantes, visto serem os produtos típicos da combustão. O coeficiente de absorção da mistura, denotado por $\kappa_{\eta,a}$, pode ser obtido pela simples adição dos coeficientes de absorção de cada componente:

$$\kappa_{\eta,a} = \kappa_{\eta,CO_2} + \kappa_{\eta,H_2O} \quad (4.7)$$

onde o coeficiente de absorção é dado pelo produto entre o coeficiente de absorção a determinada pressão e a sua pressão p , isto é, $\kappa_{\eta,c} = p_c \kappa_{p\eta,c}$, $c = H_2O$ ou CO_2 . Assim,

$$\kappa_{p\eta,a} = \frac{p_{CO_2} \kappa_{p\eta,CO_2} + p_{H_2O} \kappa_{p\eta,H_2O}}{p_a} \quad (4.8)$$

onde p_{H_2O} e p_{CO_2} são as pressões parciais de H_2O e CO_2 , e p_a é a pressão parcial total das espécies, $p_a = p_{H_2O} + p_{CO_2}$.

Uma definição importante para o modelo WSGG é a emitância total do meio ao longo de dado caminho S . A emitância total para um meio isotérmico e homogêneo é dada por:

$$\varepsilon(T, p_a S) = \frac{\int_{\eta=0}^{\infty} I_{\eta b}(\eta, T) [1 - \exp(-\kappa_{p\eta,a} p_a S)] d\eta}{\sigma T^4 / \pi} \quad (4.9)$$

onde $p_a S$ é o caminho de pressão, e $I_{\eta b}$ é a intensidade de radiação de corpo-negro, dada pela distribuição de Planck:

$$I_{\eta b}(\eta, T) = \frac{2C_1 \eta^3}{\exp(C_2 \eta / T) - 1} \quad (4.10)$$

C_1 e C_2 são constantes, respectivamente: $0,59552137 \times 10^8 \text{ W}\mu\text{m}^4/(\text{m}^2\text{sr})$ e $1,4387752 \times 10^4 \text{ }\mu\text{mK}$. Integrando a Eq. (4.9) sobre o espectro com o modelo WSGG, a emitância total se torna:

$$\varepsilon(T, p_a S) = \sum_{i=1}^I a_i(T) [1 - \exp(-\kappa_{p,i} p_a S)] \quad (4.11)$$

Nesta equação, $a_i(T)$ é a fração da emissão de corpo negro nas faixas $\Delta\eta_i$ do espectro da Fig. 10, correlacionando dados de emitância e coeficientes de absorção. Os coeficientes dependentes da temperatura $a_i(T)$ podem ser usados para resolver problemas gerais de radiação, ou seja, considerando-se variações na temperatura e nas pressões parciais das espécies participantes.

A emitância total é computada com a integração linha-por-linha (LBL) da Eq. (4.9) na faixa do espectro entre $0 < \eta < 30,000 \text{ cm}^{-1}$. A integração LBL pode ser considerada exata para a aproximação numérica de integração de cada linha. As integrações são feitas com base no HITEMP2010, banco de dados

espectral de alta resolução que fornece parâmetros espectroscópicos para gerar as linhas de transição, e que é estabelecido para aplicações de alta temperatura, incluindo gases de combustão como H_2O , CO_2 , CO e OH .

Os coeficientes utilizados neste trabalho são válidos para temperaturas entre 400K e 2500K e foram os propostos no trabalho de Dorigon et al., (2013) para quatro gases cinzas e uma mistura de dióxido de carbono e vapor de água com razão de pressão parcial $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$, obtidos realizando-se o ajuste das curvas de emitância total em relação às calculadas a partir da integração linha-por-linha das linhas espectrais através do HITEMP2010.

4.4.1.2 Solução Global da Transferência de Calor Radiativa

Aplicando o modelo WSGG, a intensidade total de radiação em uma certa direção pode ser quantificada pela simples soma das intensidades parciais I_i relacionadas a cada gás cinza:

$$I(\xi) = \sum_{i=1}^I I_i(\xi) \quad (4.12)$$

onde a intensidade parcial I_i , em W/m^2 , é obtida da integração da RTE sob a região do espectro correspondente ao gás cinza i :

$$\frac{dI_i(\xi)}{ds} = -\kappa_{p,i} p_a(\xi) I_i(\xi) + \kappa_{p,i} p_a(\xi) a_i(\xi) I_b(\xi) \quad (4.13)$$

Na equação acima, a pressão parcial das espécies participantes, $p_a(\xi)$, o coeficiente dependente da temperatura, $a_i(\xi)$, e a intensidade total de corpo negro, são avaliadas para condições locais, ou seja, para a temperatura e a concentração molar das espécies participantes no ponto ξ . Desta forma, embora o modelo WSGG assuma que o coeficiente de absorção é constante, o método pode ser aplicado para meios não-isotérmicos e não-homogêneos (Dorigon et al., 2013).

4.5 Interação Turbulência-Radiação (TRI)

Segundo o trabalho de Lemos, 2018, estudos (Amin e Foster, 1973; Li e Modest, 2002; Coelho et al., 2003; Habibi et al., 2007) comprovaram que a desconsideração das interações TRI conduz a valores subestimados para a transferência de calor por radiação, sendo que interação TRI aumenta a transferência radiativa por um fator de aproximadamente 30 %. Os autores entenderam que a radiação não afeta a estrutura da chama, no sentido de que os campos de velocidades, temperaturas e concentrações de espécies são muito pouco afetados mesmo com a inclusão das interações TRI, obtendo o resultado da diminuição na temperatura média em regiões de alta temperatura.

Os resultados mostraram que os termos mais importantes são a correlação entre o coeficiente de absorção e a temperatura e a autocorrelação de temperatura. A variância da flutuação da temperatura devido a turbulência é inclusa no problema com uma equação de transporte adicional, resolvida juntamente com as equações governantes do escoamento:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} \left(\rho \bar{u} \overline{T'^2} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \rho \bar{v} \overline{T'^2} \right) = \\ \frac{\partial}{\partial z} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial \overline{T'^2}}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left(\mu + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial \overline{T'^2}}{\partial r} \right) + 2 \frac{\mu_t}{Pr_t} \left(\frac{\partial \bar{T}}{\partial z} + \frac{\partial \bar{T}}{\partial r} \right)^2 - C_T \rho \overline{T'^2} \frac{\varepsilon}{k} \end{aligned} \quad (4.14)$$

onde $C_T = 2,0$ é a constante do modelo, constituindo a segunda parcela do termo fonte da equação (dois últimos termos).

A modelagem da equação adicional da TRI é implementada por uma rotina em linguagem C no Ansys Fluent, que juntamente com a rotina do modelo WSGG e os parâmetros disponíveis pelo CFD, resolvem a emissão de calor por radiação da chama.

5 SIMULAÇÃO

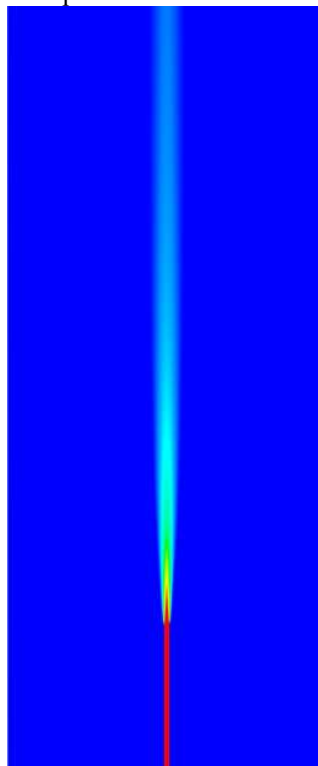
Após carregar o domínio para a plataforma de trabalho do Ansys Fluent, a simulação é configurada com a habilitação da equação da energia e ajuste do modelo de espécies. Para o *non-premixed combustion*, são importados o mecanismo de cinética química grimech3.0 e as propriedades termodinâmicas associadas thermo3.0. O grimech3.0 é um mecanismo de reação química detalhada customizado para o gás natural, com 325 reações químicas elementares e expressões de coeficientes de taxa associados para 53 espécies envolvidas, e é muito utilizado em simulações com geração de *flamelets*. Para o *chemical equilibrium* e *species transport*, foram utilizados mecanismos de apenas 4 e 1 passos, respectivamente, para avaliar a sensibilidade dos resultados a uma cinética química mais simples e também por limitações inerentes dos modelos. As condições de contorno são as mesmas para todas as simulações, distinguindo-se apenas pela configuração da fração de mistura para o *non-premixed*.

O problema é resolvido por etapas. Primeiro são simulados o escoamento com a injeção de combustível e a combustão, e só então é habilitada a transferência de calor por radiação sem e com TRI, com convergência de quinta ordem para todas as soluções.

6 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os contornos das figuras seguem a escala de cores decrescente do vermelho ao verde. A Figura 11 apresenta o escoamento desenvolvido para o modelo *species transport* e *eddy dissipation*, com a dispersão de metano no domínio. Notou-se uma significativa diferença do tempo de convergência do escoamento escolhendo a TCI *eddy dissipation* (atingindo resíduos de quinta ordem em poucos minutos) ao invés dos cálculos de Arrhenius com *finite rate*. Esta apresenta resultados satisfatórios apenas para problemas laminares (Rodrigues, 2016), apesar de permanecer disponível no Fluent para problemas de pouca turbulência.

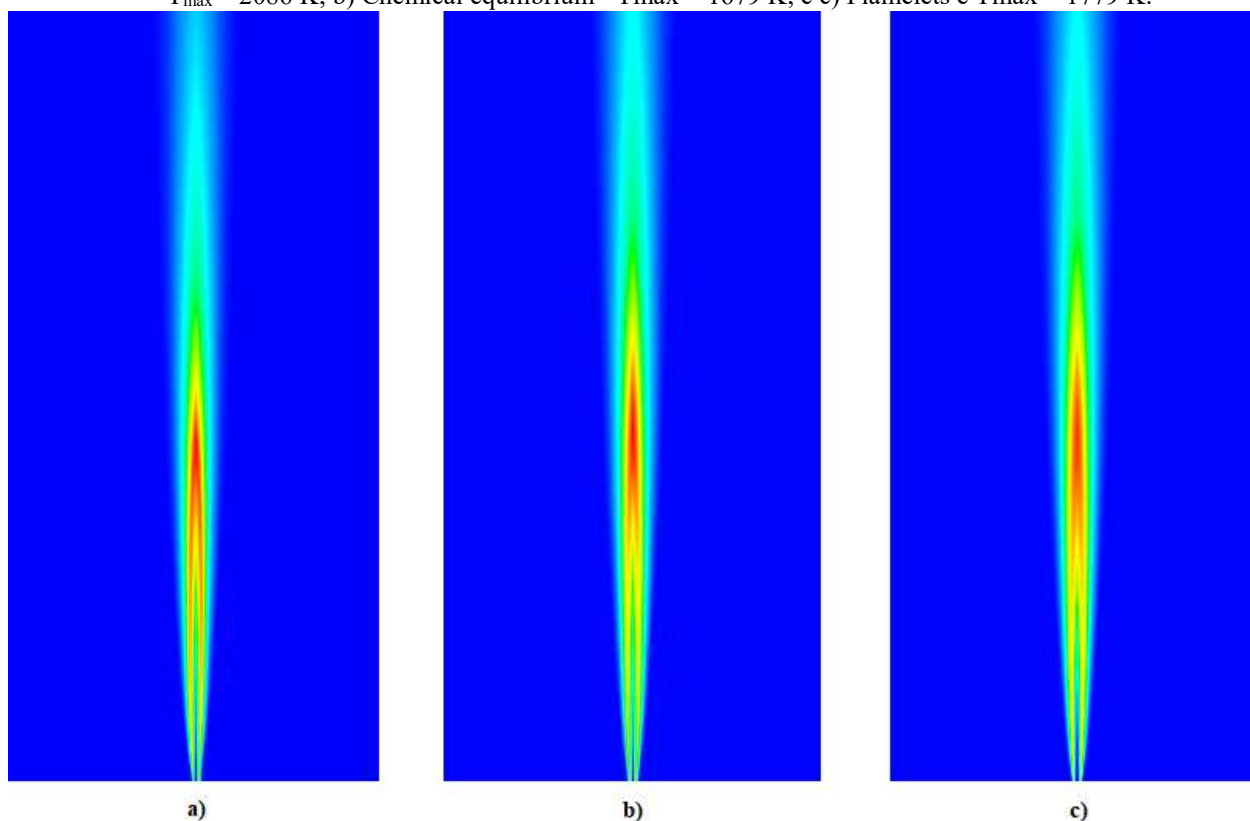
Figura 11 – Escoamento com dispersão de metano no domínio com *eddy dissipation*.



Fonte: Autora.

Enquanto a combustão modelada por cálculos clássicos de cinética química de *Arrhenius* necessita de uma energia de ativação com alto gradiente de temperatura para ocorrer a combustão, o modelo matemático da *eddy dissipation* requer uma quantidade de produtos na saída do queimador para iniciar o dinamismo apresentado pelas equações (3.19) e (3.20). Para o *non-premixed*, a combustão se dá tão logo a fração de mistura atinge um valor suficiente, ou seja, no encontro do combustível com o ar na saída do queimador. A Figura 12 apresenta as chamas formadas pela combustão do metano utilizando-se as três abordagens diferentes, com as respectivas temperaturas máximas atingidas.

Figura 12 – Contorno de temperaturas das chamas formadas pela combustão do metano. a) Eddy dissipation - $T_{\text{máx}} = 2086$ K; b) Chemical equilibrium - $T_{\text{máx}} = 1679$ K; e c) Flamelets e $T_{\text{máx}} = 1779$ K.



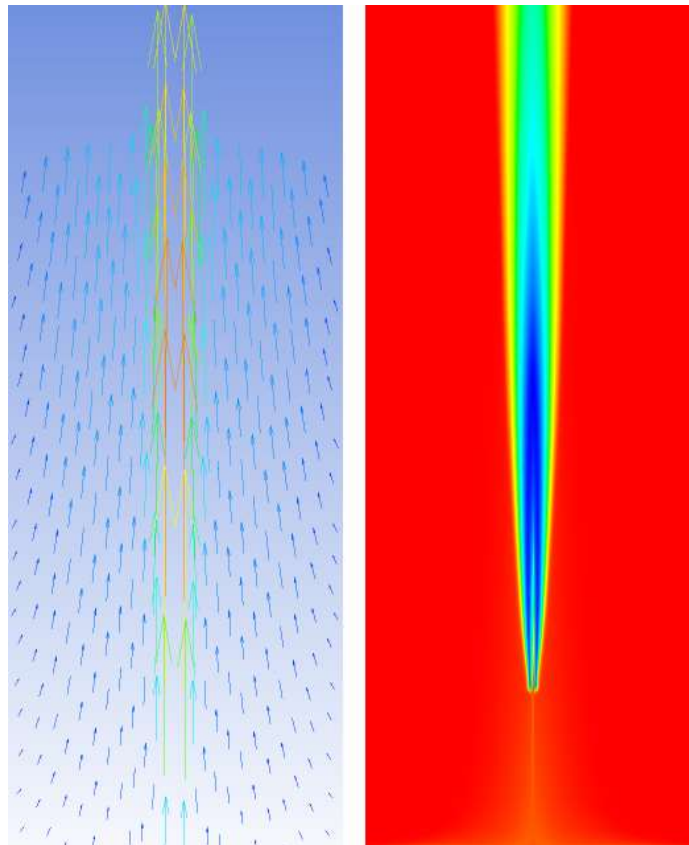
Fonte: Autora.

Na Figura 13 são trazidos, à esquerda, os vetores de velocidade na combustão, com magnitudes que variam de 3,10 m/s, na entrada do queimador, a aproximadamente 7,63 m/s ao longo do comprimento de chama. À direita nota-se que esses vetores se direcionam para as regiões de menores densidades (região da chama), além de evidenciarem a convecção livre nas laterais do domínio.

Ao habilitar o modelo WSGG de radiação sem TRI, as temperaturas máximas para os modelos eddy, chemical equilibrium e flamelets decrescem para 1815 K, 1543 K e 1550 K, respectivamente, devido a perda de calor por radiação (Eq. 3.11). Implementando a rotina TRI, essas temperaturas passam a valer 2060 K, 1608 K e 1634 K. Para poder analisar com mais clareza o comportamento dos contornos de temperatura nos três modelos, a Figura 13 traz o gráfico de temperaturas sem TRI e com TRI na linha de centro, que compreende o ponto central de saída do queimador até o final da extensão do domínio. Percebe-se pela figura que as maiores diferenças ocorrem na região de pico, a mais ou menos 1 m da saída do queimador, e que o modelo *Eddy Dissipation* foi o que mais se distanciou dos demais, as quais apresentaram temperaturas mais baixas e maior suavização no pico das curvas.

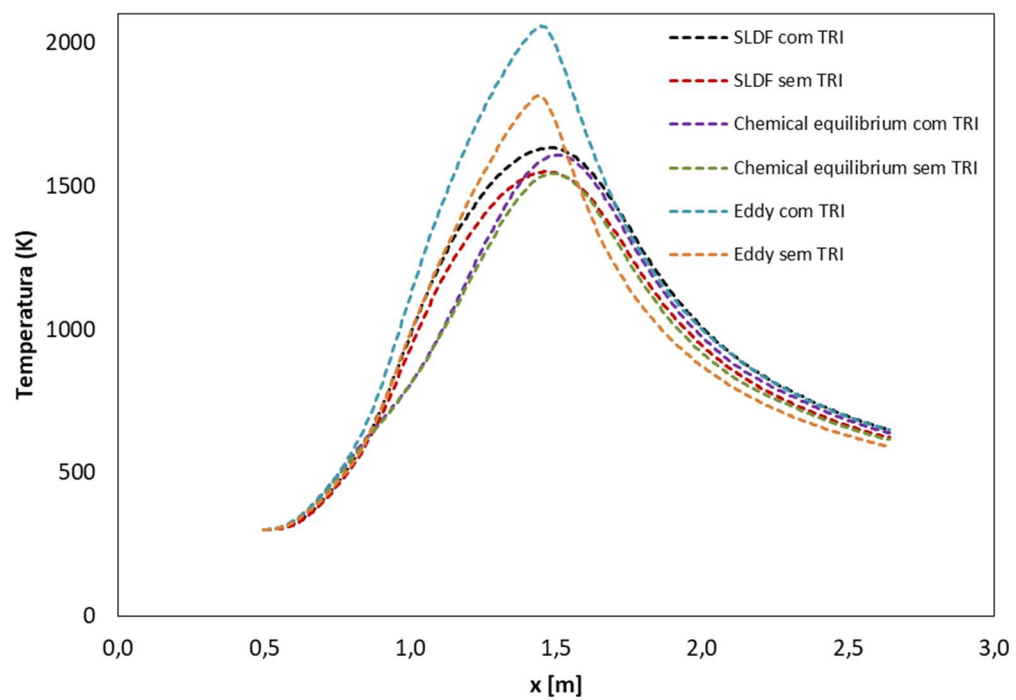
Visto que as espécies participantes H_2O e CO_2 são as principais responsáveis pelos efeitos de absorção e emissão de radiação, os gráficos das Figuras 15 e 16 apresentam as concentrações em fração mássica, de H_2O e CO_2 na mistura, sem e com TRI.

Figura 13 – Vetores de velocidade e contorno de densidade na combustão da chama.

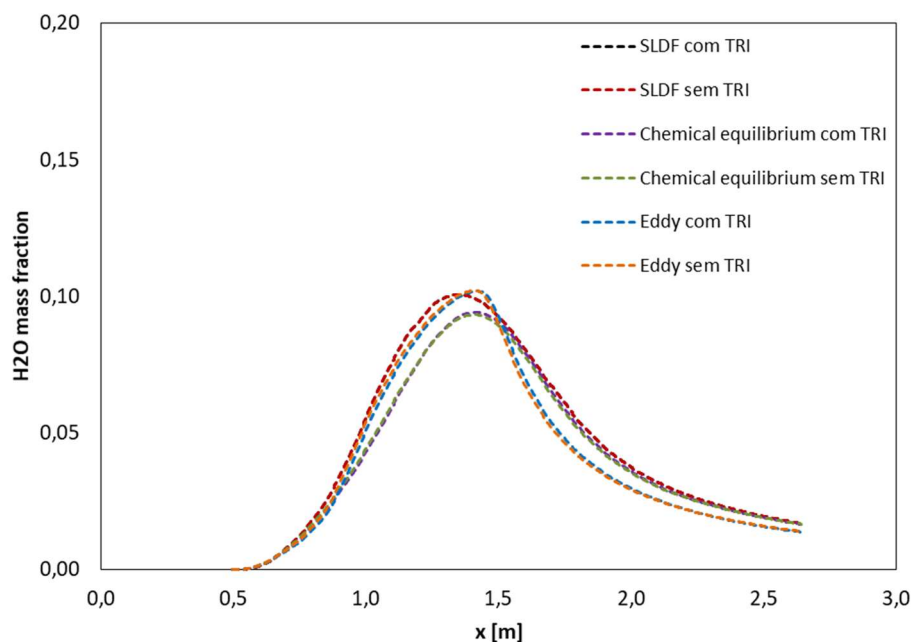


Fonte: Autora.

Figura 14 – Gráfico de temperaturas na linha de centro.

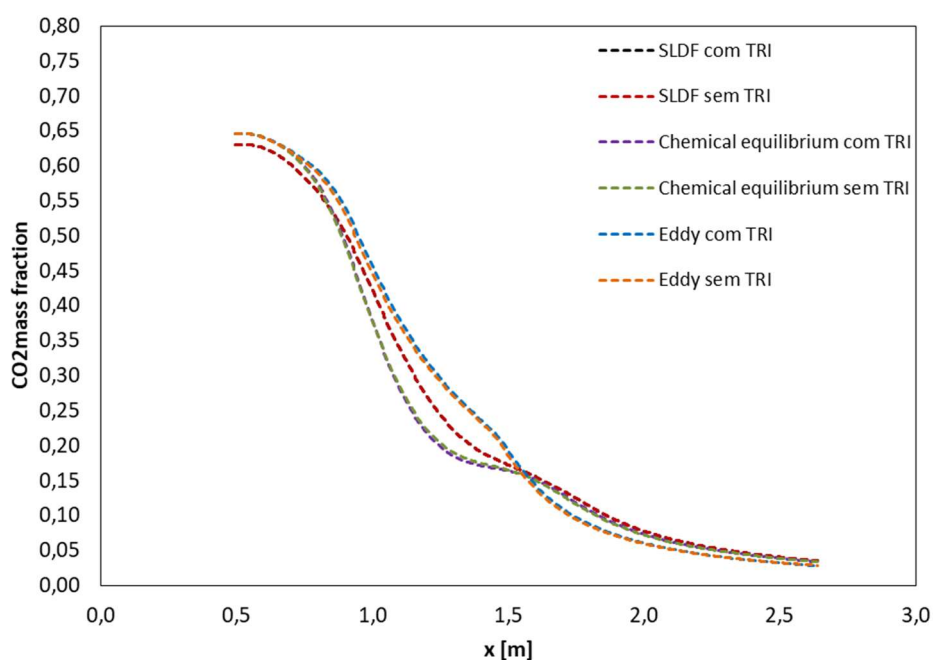


Fonte: Autora.

Figura 15 – Concentração de H₂O na linha de centro.

Fonte: Autora.

As frações mássicas de vapor d'água ficaram semelhantes para todos os modelos, sendo que o modelo *Eddy Dissipation* (ED) e o SLDF ficaram praticamente sobrepostos do início até a metade da linha central, quando o *Chemical Equilibrium* (CE) passou a se sobrepor ao SLDF. Por outro lado, a quantidade de CO₂ ficou parecida para os modelos CE e SLDF, enquanto que para o ED a fração mássica fica um pouco acima das demais no início da linha, difere-se bastante das frações mássicas dos outros dois modelos na região de pico e é um pouco subestimada no final da linha. As curvas de concentrações de espécies com e sem TRI ficaram idênticas.

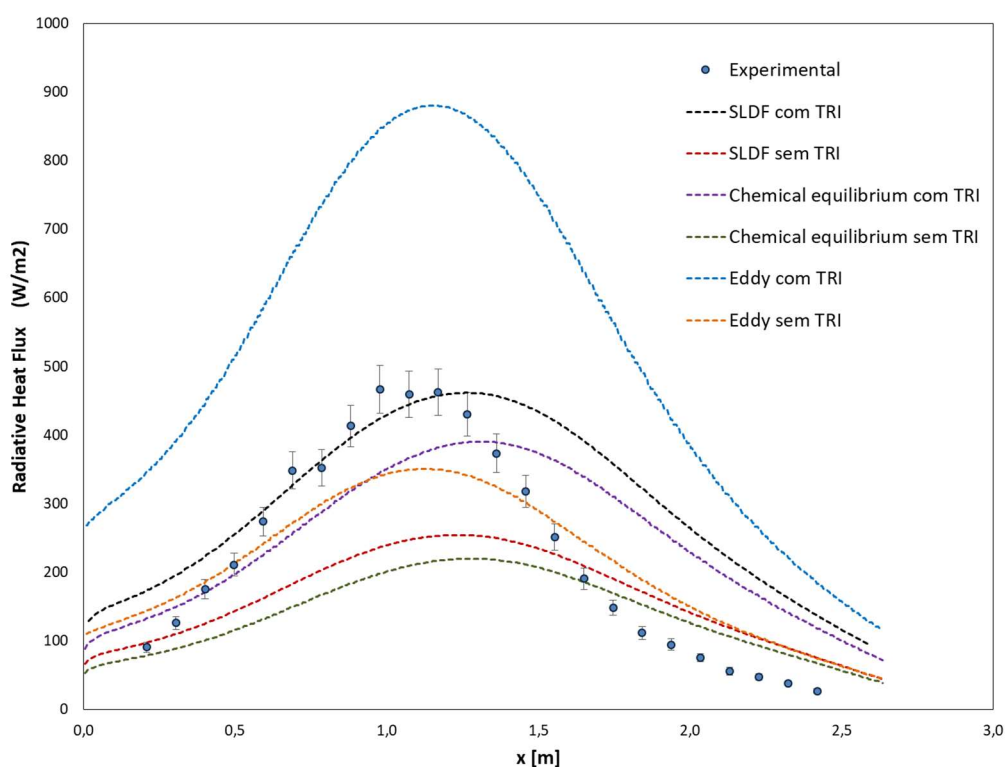
Figura 16 - Concentração de CO₂ na linha de centro.

Fonte: Autora.

As curvas do fluxo de calor radiativo estão plotadas no gráfico da Figura 17, junto aos pontos da medição experimental. Nota-se, de prontidão, que o modelo *eddy dissipation* superestima o fluxo final em todo o domínio, destoando ainda mais na região de pico. Este mesmo modelo sem TRI, apenas com o WSGG calculando a radiação, fica em torno de 100 W/m² acima dos demais modelos sem TRI, evidenciando que os maiores erros do problema se dão à medida que a dependência com a temperatura aumenta nas etapas.

Conforme esperado, o fluxo de calor radiativo final (com TRI) do modelo SLDF foi o que mais se aproximou dos dados experimentais, o que deixa claro a importância de um mecanismo detalhado de cinética química como o GriMech. Além disso, evidencia a importância da implementação do TRI no cálculo do fluxo, que é subestimado se calculado apenas com o modelo WSGG sem TRI para chamas turbulentas. Apesar de ter sido implementado com um mecanismo mais simples de cinética química (com centenas de reações intermediárias a menos), o modelo CE apresenta um resultado aceitável nos casos em que se deseja uma estimativa rápida do fluxo, já que o tempo de convergência dessa simulação foi menor.

Figura 17 – Fluxo de calor radiativo experimental e para os três modelos a uma posição radial de $0,5L_f$.



Fonte: Autora.

Um ponto importante a se considerar é o de que o domínio computacional para o modelo SLDF foi configurado para ser adaptado durante a simulação, na etapa de combustão. A variável escolhida na adaptação foi a fração de mistura, resultando em um ajuste de 41600 para em torno de 110000 elementos ao final da combustão para então ser ligada a radiação. Para os modelos ED e CE, a malha de 41600 elementos passou para em torno de 45700 nesta última figura, sendo que foi ajustada para sofrer adaptação dinâmica nos gradientes de temperatura. Este recurso do Ansys Fluent tem o intuito de, durante a simulação, aumentar e reduzir o refinamento nas regiões de maiores e menores gradientes, respectivamente, tornando a simulação mais rápida e precisa.

7 CONCLUSÕES

Foi simulada uma chama turbulenta de metano com diferentes modelos de combustão e níveis de detalhamento da cinética química, a fim de avaliar a sensibilidade do fluxo de calor radiativo a esses fatores. O problema mostrou alta sensibilidade às alterações e simplificações, principalmente no comportamento da temperatura e do fluxo, deixando clara a importância da seleção dos diferentes modelos na simulação de radiação em chamas.

O modelo CE pode resolver mecanismos mais detalhados de cinética química do que o de quatro passos utilizado, porém é preciso um ajuste numérico diferente do que estava sendo utilizado, pois os resíduos para esse modelo com o mecanismo detalhado grimech3.0 se mantiveram constantes por mais de 24 horas na combustão.

Conforme visto, as temperaturas decaíram com a inclusão do cálculo da radiação sem os efeitos da interação turbulência-radiação (TRI) nas equações governantes. Porém, para a radiação calculada com TRI, os fluxos de calor por radiação aumentaram significativamente e, apesar disso, as temperaturas voltaram a subir, fato que atenta para um possível erro de simulação, visto que uma maior transferência de calor por radiação significaria uma maior perda de calor, levando necessariamente à diminuição da temperatura.

Como uma das sugestões para testes futuros, seria repetir o problema com os modelos ED e CE configurando novamente as condições de contorno de entrada de combustível. Isto porque, como os mecanismos de cinética química importados foram muito mais restritos em comparação ao importado para o modelo SLDF, nem todas as espécies presentes na chama experimental estavam disponíveis. Uma melhor opção do que a que foi testada seria configurar exatamente a mesma quantidade de CH_4 e CO_2 presentes na chama experimental, e o restante como N_2 (espécie inerte na combustão), ao invés de frações molares de 0,6 de CH_4 e 0,4 de CO_2 como foi feito para se aproximar da chama original fechando o valor unitário.

Outra sugestão para simulações futuras é testar os mesmos dois modelos simulados com mecanismos de cinética química mais simples neste trabalho porém com mecanismos mais detalhados. Para o CE, como já mencionado, a princípio seriam precisos apenas ajustes numéricos. Para o ED, seria preciso utilizar o modelo *Large-Eddy Simulation* (LES) para a turbulência ao invés das médias de Reynolds do RANS, sendo então possível a utilização do *Eddy Dissipation Concept* (EDC), que permite maior detalhamento de cálculo para passos intermediários de reações, ao mesmo tempo que contabiliza os efeitos química-turbulência (TCI).

Seria preciso verificar também o melhor tipo de adaptação de malha (domínio) para os modelos ED e CE, pois a adaptação por gradientes de temperatura resultou em um número significativamente menor que a adaptação por fração de mistura para o SLDF. Isso pode ter sido causado pelo maior número de espécies presentes no SLDF, produzindo muitas frações de mistura diferentes.

Por fim, apesar de conter em menor quantidade na combustão de gases - principalmente os diluídos com CO_2 - a fuligem poderia ser modelada neste problema, pois pode causar maior emissão da radiação.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Fonseca, R.J.C.; Fraga, G.C.; Brittes, R.S., França, F.H.R., Application of the WSGG Model to Solve the Radiative Transfer in Gaseous System With Nongray Boundaries. J. Heat Transfer, v. 140, p.1705-1715, 2018.

Dorigon, L. J., Duciak, G., Brittes, R. S., Cassol, F., Galarça, M., França, F.H.R., WSGG Correlations Based on HITEMP2010 for Computation of Thermal Radiation in Non-Isothermal, Non-Homogeneous H₂O/CO₂ Mixtures. J. Heat Transfer, 2013.

LI, G., Modest, M.F., Importance of Turbulence-Radiation Interactions in turbulent reacting flows. In: ASME International Mechanical Engineering Congress and Exhibition. Louisina - USA, 2002b.

Lemos, D. L. Efeito das interações turbulência-irradiação em chama turbulenta não pré-misturada. 2018. Qualificação – (Doutorado em Engenharia). Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Escola de Engenharia, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2018.

Deon, D.L. Estudo numérico de chamas turbulentas não pré-misturadas através de modelos baseados no conceito de *flamelets*. 2016. Dissertação – (Mestrado em Engenharia). Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Escola de Engenharia, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2016.

Centeno F.R., Modelagem da radiação térmica em chamas turbulentas da combustão de metano em ar, Tese, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2014.

UTBR. Seção: Flare. Disponível em: <<http://www.utbr.com.br/flare/>>. Acesso em: out. 2018.

ANP. Seção: Gás Natural. Disponível em: <<http://www.anp.gov.br/gas-natural>>. Acesso em: out. 2018.

Ansys, Academic Research Mechanical, Release 19.0, Help System, User Guide, Ansys Inc., 2018b.

Ansys, Academic Research Mechanical, Release 19.0, Help System, Theory Guide, Ansys Inc., 2018b.

Poisont, T., Veynante, D., Theoretical and Numerical Combustion, RT Edwards Incorporated, 2005. (LIVRO)

Eymard, R. Gallouët, T. R. Herbin, R. (2000) *The finite volume method* Handbook of Numerical Analysis, Vol. VII, 2000, p. 713–1020. Editors: P.G. Ciarlet and J.L. Lions.

‘Gas Models’ (2017) - Prof. Francis Henrique Ramos França DEMEC/UFRGS (SLIDES)

IM – 450 ‘Modelagem em Turbulência’ - Prof. Eugênio Spanó Rosa FEM/DE UNICAMP (SLIDES)

Turns, S. R., An Introduction to Combustion-Concepts and Applications, pp. 291-297, McGraw Hill, New York, 1996.

Guilherme Sausen Welter; A Hipótese De Turbulência Localmente Isotrópica E A Universalidade Da Constante De Kolmogorov Arquivado Em 17 De Dezembro De 2007, No Wayback Machine.; Universidade Federal De Santa Maria - Centro De Ciências Naturais E Exatas - Programa De Pós-Graduação Em Física; Santa Maria, Rs, Brasil, 2006.

B. F. Magnussen and B. H. Hjertager. *"On mathematical models of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion"*. In *16th Symp. (Int'l.) on Combustion*. The Combustion Institute. 1976.

Rodrigues, L. G. P.; Pereira, F. M. ; França, F. H. R. ; Pagot, P. R. . Computation of the radiative heat flux from a laminar flame obtained with the gray gas and the weighted-sum-of-gray-gases models. In: *Proceedings of ENCIT2016 16th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering*, 2016, Vitória. 16th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering, 2016.